

مدلسازی عددی فرایند احتراق $HTPB/O_2$ در یک موتور موشک هیبریدی به منظور تعیین نرخ پسروری سطح سوخت جامد

مهدی آهنگر^{۱*}، رضا ابراهیمی^{۱**} و اکبر غفوریان^{۲***}

۱- دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی، دانشکده مهندسی هوافضا

۲- دانشگاه صنعتی شریف، دانشکده مهندسی هوافضا

(دریافت: ۱۳۸۸/۷/۱، پذیرش: ۱۳۸۹/۳/۲۵)

در این پژوهش یک روش عددی دوبعدی برای حل جریان لزج محترق درون یک موتور موشک هیبریدی به منظور تعیین نرخ پسروری سطح سوخت جامد به کار گرفته شده است. برای حل جریان از روند ضمنی $LU-SW$ بر اساس ترکیب روش تفکیک بردار شار و نلیر با روش اختلاف بالادست $MUSCL$ که از محدودکننده مین مود سود می برد، استفاده شده است. با توجه به دیگر پژوهش های تجربی صورت گرفته، جزء شیمیایی C_4H_6 به عنوان عمده محصول گازی حاصل از فرایند گرماکافت سوخت جامد $HTPB$ در نظر گرفته شده است. برای تعیین نرخ تولید این جزء شیمیایی از یک رابطه تجربی شبه آرنیوسی بهره گرفته شده است. در مرحله بعد، واکنش های شیمیایی بین C_4H_6 و اکسیژن گازی توسط یک مدل سینتیکی یازده جزئی بیست مرحله ای توصیف شده است. آشفستگی جریان نیز با به کارگیری روش جبری بالدوین-لومکس مدلسازی شده است. با حل جریان محترق، مشخصه های جریان و احتراق درون درگاه گرین ($Grain$) و نازل از قبیل توزیع دما، عدد ماخ، نرخ پسروری و دمای سطح سوخت تعیین شده است. نتایج شبیه سازی عددی برای یک موتور آزمایشگاهی ارائه شده و نرخ پسروری به دست آمده در مقایسه با دیگر نتایج عددی و تجربی تطابق خوبی را نشان می دهد.

واژگان کلیدی: موتور موشک هیبریدی، جریان محترق، گرماکافت سوخت جامد، نرخ پسروری

مقدمه

احتراق جریان اکسنده گازی بر روی سطح سوخت جامد یکی از سازوکارهایی است که در فرایند احتراق برخی سیستم های هوافضایی به کار گرفته می شود. از نمونه های این سیستم ها می توان به احتراق در موتورهای موشکی هیبریدی اشاره نمود. در موتورهای هیبریدی، شعله از نوع نفوذی است، لذا این موتورها به علت نبود پدیده هایی نظیر تراک (Detonation) و انفجار، نسبت به موتورهای سوخت مایع و جامد احتراق پایدارتری دارند. استفاده از اکسنده هایی همچون پراکسید هیدروژن و اکسیژن در این موتورها از لحاظ زیستی بسیار قابل اهمیت است. هزینه مونتاژ، ساخت پیشراندها و حمل و نقل آنها نسبتاً پایین است. قابلیت اعتماد بالا در این موتورها سبب شده که تمایل برای استفاده از آنها در کارهای فضایی روز به روز افزایش یابد [۱]. در گرین سوخت جامد این گونه موتورها، انتقال گرما از منطقه شعله به سطح سوخت باعث تأمین انرژی مورد نیاز برای شکست پیوندهای شیمیایی موجود در سوخت پلیمری شده و به تبع آن سوخت تبخیر می شود. بخار سوخت به سمت هسته جریان جابه جا شده و به طرف منطقه شعله حرکت می کند و از طرف دیگر جریان آزاد اکساینده (هسته جریان) نیز به منطقه

* کارشناس ارشد - نویسنده مخاطب (ایمیل: mahdy700@yahoo.com)

** دانشیار (ایمیل: REbrahimi@kntu.ac.ir)

*** دانشیار (ایمیل: ghafurian@fghco.com)

شعله نفوذ کرده و از برخورد این دو توده در ناحیه داخلی لایه مرزی واکنش شیمیایی رخ داده و شعله برقرار می‌شود. در موتورهای هیبریدی، سوخت در فاز جامد و اکسنده در فاز مایع یا گازی است. به طور معمول در این موتورها از سوخت HTPB (Hydroxyl Terminated Polybutadiene) به همراه اکسیژن به عنوان پیشران استفاده می‌شود. نرخ پسروری سوخت یکی از مهم‌ترین متغیرهایی است که در تعیین نقش بالستیک (Ballistic) داخلی موتورهای هیبریدی و سوخت جامد نقش اساسی را ایفا می‌کند. در موتورهای هیبریدی این نرخ عمدتاً به وسیله شار جرمی اکسنده تعیین می‌شود [۱]. شار جرمی اکسنده برابر با دبی جرمی جریان در یک مساحت درگاه (Port) احتراقی است.

به طور کلی کارهای عددی انجام شده در زمینه مدلسازی و تحلیل سازوکار احتراق هیبریدی محدود است. اساس پژوهش‌های صورت گرفته در این زمینه را می‌توان در دو بخش جستجو کرد. در بخش اول مطالعاتی هستند که بر پایه حل‌های تحلیلی انجام شده‌اند. این تحلیل‌ها با به کارگیری مفاهیم اصول نظری لایه مرزی، برای یک جریان محترق روی سطح جامد بسط داده شده‌اند. یکی از مهم‌ترین پژوهش‌ها در این زمینه توسط مارکس من [۲] انجام شده است. وی توانست با تعیین شار گرمایی به سطح سوخت، رابطه‌ای برای نرخ پسروری تعیین کند. با توسعه مفاهیم لایه مرزی در سازوکار احتراق موتورهای هیبریدی توسط مارکس من، روابط اصلاح شده دیگری نیز بر اساس کارهای تجربی توسط افرادی همچون آلتمن [۳]، اسموت [۴]، موزی [۵] و چیاورینی [۶] برای نرخ پسروری ارائه شد. با توسعه روش‌های محاسباتی در دهه نود میلادی، شبیه‌سازی عددی جریان درون این موتورها مورد توجه قرار گرفت.

چنگ و همکارانش [۷] در سال ۱۹۹۴ معادلات RANS (Reynolds Averaged Navier-Stokes) سه بعدی را با به کارگیری کد FDNS برای شبیه‌سازی جریان در موتور AMROC-DM1 حل کردند. در سال ۱۹۹۵، لیانگ و همکارانش [۸] موتور هیبریدی JIRAD با قطر ۲۴ اینچ را شبیه‌سازی کردند. آن‌ها برای حل معادلات، کد GALASYC را به کار گرفتند. ونکاتسواران و مرکل [۹] در سال ۱۹۹۶ توانستند با به کارگیری معادلات RANS دوبعدی، میدان جریان را برای احتراق بین گاز اکسیژن و سوخت HTPB شبیه‌سازی کنند. آن‌ها در پژوهش خود برای تعیین نرخ پسروری از یک معادله نیمه تجربی به همراه معادله انرژی بهره گرفتند. سرین [۱۰] نیز در سال ۲۰۰۳ با به کارگیری کد تجاری CFD-ACE جریان درون یک موتور هیبریدی را مدلسازی کرد و در نهایت، در جدیدترین پژوهش انجام شده، لونگ لین [۱۱] در سال ۲۰۰۹ با به کار گرفتن معادلات مربوط به جریان دو فاز محترق، پدیده اسپری و تبخیر قطرات اکساینده و احتراق، جریان را در یک موتور هیبریدی مدلسازی کرد.

در این پژوهش با به کارگیری روش ون لیر برای تقریب مشتقات مکانی و روش استگر-وارمینگ برای محاسبه ژاکوبین شارها در پیشروی زمانی، جریان درون موتور هیبریدی شبیه‌سازی شده است. استفاده از روش استگر-وارمینگ در گام‌های زمانی اگرچه به لحاظ زمانی نسبتاً پرهزینه است، اما به دلیل سازگاری مقادیر ویژه ژاکوبین‌های تفکیک شده در این روش با مشخصه‌های سرعت جریان، در مسائل احتراقی که سختی (Stiffness) حل در آن‌ها بسیار بالاست، سبب افزایش سرعت همگرایی حل می‌شود. به منظور تعیین نرخ پسروری سوخت از ترکیب معادله انرژی و یک رابطه تجربی استفاده شده است. در بیشتر پژوهش‌های نامبرده برای مدل کردن سینتیک شیمیایی از واکنش‌های کلی تک مرحله‌ای یا دو مرحله‌ای استفاده شده است، در حالی که در این پژوهش یک مکانیزم یازده جزئی بیست مرحله‌ای به کار گرفته شده است. در ادامه معادلات حاکم بر جریان محترق دوبعدی و روش‌های عددی مذکور تشریح شده‌اند. سپس زیرمدل‌های فیزیکی و شیمیایی استفاده شده به همراه هندسه و شرایط مرزی بیان شده و در نهایت نتایج به دست آمده برای یک موتور هیبریدی واقعی، بررسی شده است.

معادلات حاکم

معادلات حاکم بر جریان دوبعدی درون یک موتور هیبریدی، شامل معادلات دوبعدی تراکم‌پذیر متوسط‌گیری شده ناویر-استوکس به همراه معادلات انتقال اجزای شیمیایی است [۱۲]. این معادلات را می‌توان به شکل کاملاً پایستار (بقایی) و در مختصات منحنی الخط (ξ, η) به صورت زیر نوشت:

$$\frac{\partial \hat{\mathbf{Q}}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \xi} (\hat{\mathbf{E}} - \hat{\mathbf{E}}_v) + \frac{\partial}{\partial \eta} (\hat{\mathbf{F}} - \hat{\mathbf{F}}_v) = \hat{\mathbf{H}} \quad (1)$$

که در آن

$$\hat{\mathbf{Q}} = J\mathbf{Q} \quad (2)$$

$$\hat{\mathbf{E}} = J(\xi_x \mathbf{E} + \xi_y \mathbf{F}) \quad (3)$$

$$\hat{\mathbf{F}} = J(\eta_x \mathbf{E} + \eta_y \mathbf{F}) \quad (4)$$

$$\hat{\mathbf{E}}_v = J(\xi_x \mathbf{E}_v + \xi_y \mathbf{F}_v) \quad (5)$$

$$\hat{\mathbf{F}}_v = J(\eta_x \mathbf{E}_v + \eta_y \mathbf{F}_v) \quad (6)$$

$$\hat{\mathbf{H}} = J\mathbf{H} \quad (7)$$

در معادلات فوق J مساحت سلول، x و y مؤلفه‌های مختصات کارتیزین، \mathbf{Q} بردار متغیرهای وابسته و \mathbf{E} و \mathbf{F} بردارهای شار جابه‌جایی هستند که برای جریان دوبعدی فوق به صورت زیر است.

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho e \\ \rho Y_i \end{pmatrix} \quad \mathbf{E} = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ u(\rho e + p) \\ \rho u Y_i \end{pmatrix} \quad \mathbf{F} = \begin{pmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ v(\rho e + p) \\ \rho v Y_i \end{pmatrix} \quad (8)$$

متغیرهای \mathbf{E}_v و \mathbf{F}_v که بیانگر بردارهای شار لزج هستند، چنین می‌باشند.

$$\mathbf{E}_v = \begin{pmatrix} 0 \\ \tau_{xx} \\ \tau_{xy} \\ u\tau_{xx} + v\tau_{xy} - q_x \\ -\rho \hat{u}_i Y_i \end{pmatrix} \quad \mathbf{F}_v = \begin{pmatrix} 0 \\ \tau_{yx} \\ \tau_{yy} \\ u\tau_{yx} + v\tau_{yy} - q_y \\ -\rho \hat{v}_i Y_i \end{pmatrix} \quad (9)$$

\mathbf{H} نیز بیانگر بردار مقادیر چشمه است.

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \dot{\omega}_i \end{pmatrix} \quad (10)$$

کمیات مربوط به انرژی مخصوص کلی (e)، مؤلفه‌های تنش برشی و مؤلفه‌های شار گرمایی در دستگاه کارتیزین به ترتیب زیر محاسبه می‌شوند.

$$e = \sum_{i=1}^{N_s} Y_i e_i + \frac{1}{2}(u^2 + v^2) \quad (11)$$

$$\tau_{xx} = 2\mu \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{3}\mu \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) \quad (12)$$

$$\tau_{yy} = 2\mu \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{2}{3}\mu \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) \quad (13)$$

$$\tau_{xy} = \tau_{yx} = \mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \quad (14)$$

$$q_x = -k \frac{\partial T}{\partial x} + \rho \sum_{i=1}^{N_s} h_i Y_i \hat{u}_i \quad (15)$$

$$q_y = -k \frac{\partial T}{\partial y} + \rho \sum_{i=1}^{N_s} h_i Y_i \hat{v}_i \quad (16)$$

در معادلات بالا ρ چگالی، u و v مؤلفه‌های سرعت در مختصات کارتزین، p فشار و e انرژی مخصوص کل است. زیرنویس i مربوط به هر یک از اجزا و N_s نشانگر تعداد کل اجزاست. برای جزء i ام مقادیر Y_i ، e_i ، h_i و \hat{w}_i به ترتیب نشان دهنده کسر جرمی، انرژی داخلی مخصوص، آنتالپی و نرخ تشکیل جزء مربوطه است. آنتالپی جزء i ام از طریق انتگرال‌گیری C_p برحسب دما به دست می‌آید.

$$h_i = \int_0^T C_{p_i} dT \quad (17)$$

در این رابطه C_{p_i} گرمای ویژه در فشار ثابت است که به صورت یک چندجمله‌ای درجه چهار از دما بیان می‌شود.

$$C_{p_i} = C_{p_i,0} + C_{p_i,1}T + C_{p_i,2}T^2 + C_{p_i,3}T^3 + C_{p_i,4}T^4 \quad (18)$$

انرژی داخلی جزء i ام به کمک h_i و با استفاده از فرض گاز ایدئال (که برای دماهای بالا صادق است) به دست می‌آید.

$$e_i = h_i - R_i T \quad (19)$$

که در آن R_i ثابت گازها برای جزء i ام است.

مؤلفه‌های سرعت نفوذی جزء شیمیایی i ام (\hat{u}_i و \hat{v}_i) با استفاده از قانون فیک به دست می‌آید.

$$Y_i \hat{u}_i = -D_{im} \frac{\partial Y_i}{\partial x} \quad (20)$$

$$Y_i \hat{v}_i = -D_{im} \frac{\partial Y_i}{\partial y} \quad (21)$$

که در آن

$$D_{im} = (1 - X_i) / \sum_{i \neq j} \frac{X_j}{D_{ij}} \quad (22)$$

بیانگر ضریب نفوذ دوتایی مؤثر جزء i ام در مخلوط گاز و X_i کسر مولی جزء i ام است. ویژگی‌های ترموفیزیکی مانند لزجت و ضریب هدایت گرمایی به صورت چند جمله‌ای‌هایی از دما بیان می‌شوند و در نهایت ویژگی‌های مخلوط گاز بر مبنای قانون اختلاط ویلک^۱ از طریق مقادیر خواص مربوط به هر جزء، محاسبه می‌شود. ضرایب نفوذ دوتایی جرم بر اساس نظریه چاپمن-انسکوگ^۲ به دست می‌آیند [۱۳]. سایر ویژگی‌های ترموفیزیکی در مرجع [۱۳] آورده شده‌اند.

محاسبات مکانی

مؤلفه‌های بردار شار تفکیک شده در مختصات دوبعدی با استفاده از روش ون لیر [۱۴]، به صورت زیر به دست می‌آید.

$$E_1^\pm = \pm \frac{1}{4} \rho C (\bar{M} \pm 1)^2 \quad (23)$$

$$E_2^\pm = E_1^\pm [u - \xi_x (U \mp 2C) \frac{P}{\rho C^2}] \quad (24)$$

$$E_3^\pm = E_1^\pm [v - \xi_y (U \mp 2C) \frac{P}{\rho C^2}] \quad (25)$$

$$E_4^\pm = E_1^\pm [H - mc^2 (\bar{M} \mp 1)^2] \quad (26)$$

^۱ Wilke's Mixing Rule

^۲ Chapman-Enskog Theory

$$E_{i+4}^{\pm} = E_1^{\pm} Y_i^{\pm}, \quad i \geq 1 \quad (27)$$

در این معادلات $C = c \sqrt{\xi_x^2 + \xi_y^2}$ ، $U = u \xi_x + v \xi_y$ و $\bar{M} = U/C$ و H آنتالپی کل است. بردار شار در جهت η (F^{\pm}) با جایگزینی η به جای ξ در سری معادلات (۲۳) تا (۲۷) قابل دستیابی است. در معادلات بالا از تعریف سرعت منجمد صوت^۱ استفاده می‌شود.

$$c^2 = \frac{p}{\rho} \left(1 + \frac{R}{C_v}\right) \quad (28)$$

که در آن $C_v = \sum_{i=1}^N Y_i C_{v,i}$ و $R = R_u \sum_{i=1}^N Y_i / W_i$ است. محاسبه شارهای گسسته بر اساس طرح MUSCL انجام می‌شود. این روش یکی از زیر خانواده‌های روش‌های کاهش تغییرات کلی^۲ (T.V.D.) محسوب شده و متضمن حفظ یکنوایی حل در حول ناپیوستگی‌هاست [۱۵]. بر مبنای این روش مشتق شار غیرلج بدین گونه محاسبه می‌شود.

$$\left(\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial \xi}\right)_i = \left[\mathbf{E}^+ (\tilde{\mathbf{Q}}_{i+1/2}^-) + \mathbf{E}^- (\tilde{\mathbf{Q}}_{i+1/2}^+) \right] - \left[\mathbf{E}^+ (\tilde{\mathbf{Q}}_{i-1/2}^-) + \mathbf{E}^- (\tilde{\mathbf{Q}}_{i-1/2}^+) \right] \quad (29)$$

که در آن

$$\tilde{\mathbf{Q}} = \begin{bmatrix} \rho \\ u \\ v \\ p \\ Y_i \end{bmatrix} \quad (30)$$

صورت کلی $\tilde{\mathbf{Q}}^+$ و $\tilde{\mathbf{Q}}^-$ به شکل زیر است:

$$\tilde{\mathbf{Q}}_{i+\frac{1}{2}}^- = \tilde{\mathbf{Q}}_i + \frac{1}{4} l_i [(1-\kappa)\phi_- + (1+\kappa)\phi_+]_i \quad (31)$$

$$\tilde{\mathbf{Q}}_{i+\frac{1}{2}}^+ = \tilde{\mathbf{Q}}_{i+1} - \frac{1}{4} l_{i+1} [(1-\kappa)\phi_+ + (1+\kappa)\phi_-]_{i+1} \quad (32)$$

که

$$\phi_{+,i} = \max \left[0, \min \left(\frac{\Delta_+}{l_{c_i}} \operatorname{sgn} \Delta_-, b \frac{\Delta_-}{l_{c_{i-1}}} \operatorname{sgn} \Delta_+ \right) \right] \operatorname{sgn} \Delta_+ \quad (33)$$

$$\phi_{-,i} = \max \left[0, \min \left(\frac{\Delta_-}{l_{c_{i-1}}} \operatorname{sgn} \Delta_+, b \frac{\Delta_+}{l_{c_i}} \operatorname{sgn} \Delta_- \right) \right] \operatorname{sgn} \Delta_- \quad (34)$$

و

$$\Delta_+ = \tilde{\mathbf{Q}}_{i+1} - \tilde{\mathbf{Q}}_i \quad (35)$$

$$\Delta_- = \tilde{\mathbf{Q}}_i - \tilde{\mathbf{Q}}_{i-1} \quad (36)$$

l_i فاصله میان گره‌های i و $i+1$ و l_{c_i} فاصله میان مرکز سلول‌های i و $i+1$ را نشان می‌دهد. b در معادلات (۳۳) و (۳۴) بیانگر متغیر فشردگی است که به شکل $b = \frac{3-\kappa}{1-\kappa}$ تعریف می‌شود. به عنوان مثال طرح مرتبه ۳ بالادست با قرار دادن $\kappa = 1/3$ قابل دستیابی است.

^۱ Frozen Speed of Sound

^۲ Total variation Diminishing

محاسبات زمانی

برای حل معادلات حاکم بر جریان‌های محترق روش‌های مختلفی وجود دارد. از بین این روش‌ها، روندهای صریح عموماً هنگامی که جریان دارای نرخ بالایی از واکنش شیمیایی باشد، در همگرایی کند هستند. در مقابل بیشتر روندهای ضمنی احتیاج به معکوس‌گیری از ماتریس‌های جعبه‌ای نواری دارند که برای واکنش‌های شیمیایی پیچیده که شامل تعداد زیادی جزء شیمیایی هستند، بسیار پرهزینه و وقتگیرند. یکی از روش‌هایی که در حل مسایل احتراق دارای سرعت همگرایی بالایی است روش فاکتورگیری موسوم به تجزیه LU^۱ است. این روش برای حل عددی معادله (۱) در دو گام به صورت زیر ارائه شده است [۱۶].

$$\left[\mathbf{I} + \Delta t \left(D_{\xi}^{-} \hat{\mathbf{A}}^{+} + D_{\eta}^{-} \hat{\mathbf{B}}^{+} - \frac{\hat{\mathbf{A}}^{-}}{\Delta \xi} - \frac{\hat{\mathbf{B}}^{-}}{\Delta \eta} - \hat{\mathbf{D}} \right) \right] \Delta \hat{\mathbf{Q}}^{*} = -\Delta t \text{RHS} \quad \text{گام اول (۳۷)}$$

$$\left[\mathbf{I} + \Delta t \left(D_{\xi}^{+} \hat{\mathbf{A}}^{-} + D_{\eta}^{+} \hat{\mathbf{B}}^{-} + \frac{\hat{\mathbf{A}}^{+}}{\Delta \xi} + \frac{\hat{\mathbf{B}}^{+}}{\Delta \eta} \right) \right] \Delta \hat{\mathbf{Q}} = \left[\mathbf{I} + \Delta t \left(\frac{\hat{\mathbf{A}}^{+}}{\Delta \xi} - \frac{\hat{\mathbf{A}}^{-}}{\Delta \xi} + \frac{\hat{\mathbf{B}}^{+}}{\Delta \eta} - \frac{\hat{\mathbf{B}}^{-}}{\Delta \eta} \right) \right] \Delta \hat{\mathbf{Q}}^{*} \quad \text{گام دوم (۳۸)}$$

$$\tilde{\mathbf{Q}}^{n+1} = \tilde{\mathbf{Q}}^n + \Delta \tilde{\mathbf{Q}} \quad (۳۹)$$

در این معادلات \mathbf{A} ، \mathbf{B} ، \mathbf{D} به ترتیب ماتریس‌های ژاکوبین بردارهای \mathbf{E} ، \mathbf{F} و \mathbf{H} هستند. استگر و وارمینگ [۱۷] با استفاده از قضیه انتقال تشابهی، این ماتریس‌ها را به صورت زیر تفکیک کردند.

$$\hat{\mathbf{A}}^{\pm} = \hat{\mathbf{M}}_{\xi} \Lambda_{\xi}^{\pm} \hat{\mathbf{M}}_{\xi}^{-1} \quad (۴۰)$$

$$\hat{\mathbf{B}}^{\pm} = \hat{\mathbf{M}}_{\eta} \Lambda_{\eta}^{\pm} \hat{\mathbf{M}}_{\eta}^{-1} \quad (۴۱)$$

در این روابط Λ_{ξ}^{\pm} و Λ_{η}^{\pm} ماتریس‌های قطری مقادیر ویژه‌اند. همچنین $\hat{\mathbf{M}}_{\xi}$ و $\hat{\mathbf{M}}_{\eta}$ بیانگر بردارهای ویژه متناظر با مقادیر ویژه‌اند. توجه شود که ژاکوبین عبارت مولد تنها در یک جارو (Sweep) ظاهر شده است تا زمان محاسبه عبارت مولد که برای جریان‌های با شیمی غیرتعادلی بسیار پرهزینه است، حداقل شود.

در گام اول، عبارت RHS که از خطی‌سازی معادله (۱) در سمت راست این جارو پدیدار می‌شود، به شکل زیر است.

$$\text{RHS} = \left[\frac{\partial(\hat{\mathbf{E}} - \hat{\mathbf{E}}_v)}{\partial \xi} + \frac{\partial(\hat{\mathbf{F}} - \hat{\mathbf{F}}_v)}{\partial \eta} - \hat{\mathbf{H}} \right] \quad (۴۲)$$

گرماکافت سوخت جامد

عموماً برای نشان دادن چگونگی ارتباط نرخ پسروری سطح سوخت جامد ناشی از فرایند گرماکافت (Pyrolysis) با سینتیک محصولات گازی ناشی از تجزیه پلیمرهای سوخت‌های کامپوزیتی، از روابطی شبیه به معادله آرنیوس استفاده می‌شود.

$$\dot{r} = A \exp\left(-\frac{E_a}{R_u T_s}\right) \quad (۴۳)$$

در این رابطه، \dot{r} نرخ پسروری، E_a انرژی فعالسازی، T_s دمای سطح سوخت، R_u ثابت جهانی گازها و A ثابت تجزیه است. در این پژوهش برای مدل‌سازی نرخ پسروری از نتایج ارائه شده توسط چیاورینی [۱۸] استفاده شده است. مطالعات وی حاکی از آن است که سهم عمده محصولات گرماکافت سوخت HTPB را ماده ۱,3-Butadiene (C_4H_6) تشکیل می‌دهد. همچنین این نتایج نشان می‌دهند که نرخ تشکیل محصولات گازی در حین فرایند گرماکافت مستقل از فشار است.

^۱ Lower-Upper Decomposition

مدل آشفته‌گی

در پژوهش انجام شده از مدل جبری بالدوین و لومکس [۱۹] برای محاسبه لزجت آشفته استفاده شده و فرض می‌شود که عدد پرانتل و اشمیت آشفته ثابت و برابر ۰/۹ باشد. مزیت اصلی این روش این است که احتیاجی به تعیین ضخامت لایه مرزی، که اغلب برای جریان‌های پیچیده دشوار است، نیست. هرچند اثرات آشفته‌گی بر سینتیک شیمیایی می‌تواند در نواحی ویژه‌ای چون ناحیه بازچرخش و محل تزریق سوخت بسیار شدید باشد، لیکن در اینجا از اثرات آشفته‌گی بر سینتیک شیمیایی صرف‌نظر می‌شود.

مدل شیمی فاز گازی

برای محاسبه عبارت مولد در معادلات انتقال اجزای شیمیایی از قانون آرنیوس استفاده شده است. سازوکارهای شیمیایی متفاوتی در پژوهش‌های انجام شده پیشنهاد شده‌اند. به طور معمول واکنش‌های شیمیایی بر اساس دو رویکرد سازوکارهای کلی و شبه‌کلی ارائه می‌شوند. در سازوکارهای کلی که عمدتاً دو مرحله‌ای هستند، در مرحله نخست سوخت به آب و مونواکسیدکربن تبدیل شده و در مرحله بعد مونواکسیدکربن در واکنش با اکسیژن به دی‌اکسیدکربن تبدیل می‌شود. در سازوکارهای شبه‌کلی در گام اول سوخت در اثر واکنش با اکسیژن تولید هیدروژن و مونواکسیدکربن کرده و سپس هر یک از این اجزا در واکنش‌هایی مقدماتی با اکسیژن، تولید آب و دی‌اکسیدکربن می‌کنند. به طور مثال ونکاتسواران در پژوهش خود از یک سازوکار دومرحله‌ای کلی، پیشنهاد شده توسط وستبروک استفاده کرده است [۲۰]. چنگ [۷] نیز از دو سازوکار (۱) کلی دومرحله‌ای و (۲) شبه‌کلی سیزده مرحله‌ای بهره برده است. نتایج وی نشان می‌دهند که سازوکار دومرحله‌ای مقدار دما را بیشتر از میزان واقعی پیش‌بینی می‌کند. در این پژوهش از یک سازوکار تک‌مرحله‌ای برای سوختن C_4H_6 با اکسیژن گازی و تبدیل آن به هیدروژن و مونواکسیدکربن استفاده شده است [۲۱]. برای سوختن هیدروژن مدل ۸ جزئی به همراه ۱۸ واکنش برابری به کار گرفته شده است [۲۲]. مونواکسیدکربن نیز توسط مدل تک‌مرحله‌ای ارائه شده توسط وستبروک به دی‌اکسیدکربن تبدیل می‌شود [۲۳]. این سازوکارها در جدول‌های (۱) تا (۳) آورده شده‌اند. قابل ذکر است که در راستای انجام این پژوهش بیش از ده‌ها مدل سینتیک شیمیایی استفاده شده است. بیشتر این مدل‌ها، مقدار دما را بیش از ۴۵۰۰ کلوین پیش‌بینی می‌کنند که این مقدار با نتایج تجربی سازگاری ندارد. در نهایت مدل ارائه شده در جدول‌های (۱) تا (۳) به دلیل توانایی بالا در پیش‌بینی دمای شعله (حدود ۳۵۰۰ کلوین) و هزینه محاسباتی نسبتاً پایین، مورد قبول واقع شد.

جدول ۱- سازوکار واکنش هیدروژن- اکسیژن پیشنهاد شده توسط برابری [۲۲] (واحد‌ها بر حسب mol, K, m)

واکنش	k_f	k_b
$H_2 + OH \rightleftharpoons H_2O + H$	$4.74 \times 10^{10} \exp\left(\frac{-3068.95}{T}\right)$	$2.03138 \times 10^{12} T^{-0.274934} \exp\left(\frac{-10985.23}{T}\right)$
$O_2 + H \rightleftharpoons OH + O$	$1.85 \times 10^{11} \exp\left(\frac{-8253.65}{T}\right)$	$4.52315 \times 10^8 T^{0.410439} \exp\left(\frac{412.94}{T}\right)$
$H_2 + O \rightleftharpoons OH + H$	$4.2 \times 10^{11} \exp\left(\frac{-6919.98}{T}\right)$	$2.2825 \times 10^{11} T^{-0.0246801} \exp\left(\frac{-5998.64}{T}\right)$
$O_2 + H \rightleftharpoons HO_2$	$1.35 \times 10^9 \exp\left(\frac{503.27}{T}\right)$	$5.1015 \times 10^{13} T^{-0.4236663} \exp\left(\frac{-25765.13}{T}\right)$
$H_2 \rightleftharpoons H + H$	$2.2 \times 10^{11} \exp\left(\frac{-48314.074}{T}\right)$	$4.38485 \times 10^7 T^{0.0320618} \exp\left(\frac{-4166.86}{T}\right)$
$O_2 \rightleftharpoons O + O$	$1.8 \times 10^{15} T^{-1} \exp\left(\frac{-59369.074}{T}\right)$	$1.51713 \times 10^9 T^{-0.525515} \exp\left(\frac{840.326}{T}\right)$

$\text{H}+\text{HO}_2 \rightleftharpoons \text{H}_2+\text{O}_2$	$1.3 \times 10^{11} \exp\left(\frac{-1509.814}{T}\right)$	$1.275 \times 10^{10} T^{-0.427332} \exp\left(\frac{-27672.11}{T}\right)$
$\text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{OH}+\text{H}$	$1.3 \times 10^{12} \exp\left(\frac{-52913.94}{T}\right)$	$5.73655 \times 10^6 T^{0.313192} \exp\left(\frac{7491.96}{T}\right)$
$\text{H}_2\text{O}+\text{O} \rightleftharpoons \text{OH}+\text{OH}$	$6.8 \times 10^{10} \exp\left(\frac{-9242.577}{T}\right)$	$8.613 \times 10^8 T^{0.250384} \exp\left(\frac{-404.780}{T}\right)$
$\text{O}+\text{HO}_2 \rightleftharpoons \text{O}_2+\text{OH}$	$5.0 \times 10^{10} \exp\left(\frac{-503.27}{T}\right)$	$2.6504 \times 10^9 T^{0.403293} \exp\left(\frac{-25743.37}{T}\right)$
$\text{H}+\text{HO}_2 \rightleftharpoons \text{OH}+\text{OH}$	$2.04 \times 10^{11} \exp\left(\frac{-538.5}{T}\right)$	$2.768 \times 10^7 T^{0.808315} \exp\left(\frac{-17119.5}{T}\right)$
$\text{OH}+\text{HO}_2 \rightleftharpoons \text{O}_2+\text{H}_2\text{O}$	$8.0 \times 10^9 \exp\left(\frac{-1499.75}{T}\right)$	$4.05365 \times 10^{10} T^{0.130335} \exp\left(\frac{-35609.15}{T}\right)$
$\text{H}_2+\text{HO}_2 \rightleftharpoons \text{H}+\text{H}_2\text{O}_2$	$7.91 \times 10^{10} \exp\left(\frac{-12581.78}{T}\right)$	$5.07334 \times 10^{12} T^{0.411882} \exp\left(\frac{-3160.89}{T}\right)$
$\text{OH}+\text{H}_2\text{O}_2 \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O}+\text{HO}_2$	$6.1 \times 10^9 \exp\left(\frac{-719.678}{T}\right)$	$3.761 \times 10^9 T^{0.14644} \exp\left(\frac{-18043.1}{T}\right)$
$\text{HO}_2+\text{HO}_2 \rightleftharpoons \text{O}_2+\text{H}_2\text{O}_2$	1.8×10^9	$1.0845 \times 10^{10} T^{0.0205195} \exp\left(\frac{-16734.1}{T}\right)$
$\text{H}+\text{H}_2\text{O}_2 \rightleftharpoons \text{OH}+\text{H}_2\text{O}$	7.8×10^8	$1.04212 \times 10^5 T^{0.89952} \exp\left(\frac{-33982.3}{T}\right)$
$\text{H}_2\text{O}_2 \rightleftharpoons \text{OH}+\text{OH}$	$1.44 \times 10^{14} \exp\left(\frac{-22903.875}{T}\right)$	$8.487 \times 10^4 T^{1.21277} \exp\left(\frac{3519.125}{T}\right)$
$\text{H}+\text{O} \rightleftharpoons \text{OH}$	$7.1 \times 10^{12} T^{-1}$	$2.1057 \times 10^{16} T^{-1.0666587} \exp\left(\frac{-51573.5}{T}\right)$

جدول ۲- سازوکار کلی تک مرحله‌ای اکسیداسیون سوخت [۲۱] (واحدها بر حسب mol, K, cm)

واکنش	k_f	k_b
$\text{C}_4\text{H}_6+2\text{O}_2 \longrightarrow 4\text{CO}+3\text{H}_2$	$3.8 \times 10^{11} \exp\left(\frac{-1.52 \times 10^4}{T}\right) \times [\text{C}_4\text{H}_6]^{0.5} [\text{O}_2]^{1.25}$	0

جدول ۳- سازوکار کلی تک مرحله‌ای اکسیداسیون مونواکسید کربن [۲۳] (واحدها بر حسب mol, K, cm)

$\text{CO}+0.5\text{O}_2 \rightleftharpoons \text{CO}_2$	$10^{14.6} \times \exp\left(\frac{-2.0143 \times 10^4}{T}\right) \times [\text{CO}]^1 [\text{H}_2\text{O}]^{0.5} [\text{O}_2]^{-0.25}$	$5 \times 10^8 \exp\left(\frac{-2.0143 \times 10^4}{T}\right) \times [\text{CO}_2]^1$
--	--	---

سطح مشترک گاز- جامد

به طور کلی در فرایند احتراق موتورهای سوخت جامد و هیبریدی، سطح سوخت جامد درگیر فرایند گرماکافت است. در اثر این پدیده به دلیل انتقال گرما از ناحیه شعله به سطح سوخت جامد، پلیمرهای سوخت دچار از هم‌پاشیدگی و در نهایت واجذبی و شکست پیوندها می‌شود. هر یک از این پدیده‌ها دارای پیچیدگی‌هایی هستند که شناخت جزئیات آن‌ها برای تعیین شرایط مرزی روی سطح سوخت جامد ضرورتی ندارد.

در ناحیه گرماکافت که به صورت نواری بسیار باریک با ضخامت ناچیز و چسبیده به سطح سوخت جامد در نظر گرفته می‌شود، دو رویداد مهم وجود دارد: (۱) تزریق جرم توسط بخارهای سوخت جامد گازی شده از این ناحیه به سمت شعله

(۲) انتقال گرما با ناحیه شعله و همین‌طور سوخت جامد. بر طبق قوانین بقا باید تعادل انرژی و جرم، در ناحیه سطح مشترک گاز-جامد (گرماکافت) برقرار باشد. برای سهولت در به دست آوردن معادلات فرض می‌شود که سطح سوخت ثابت است و تزریق جرم از سوخت جامد به ناحیه گرماکافت با سرعتی برابر نرخ پسروری انجام می‌شود. بنابراین قانون بقای جرم نتیجه می‌دهد که:

$$\rho_g v_g = -\rho_f \dot{r} \quad (44)$$

همان‌طور که ملاحظه می‌شود سرعت معمول گازهای خروجی از ناحیه گرماکافت به داخل قلمرو حل را می‌توان از رابطه بالا تعیین کرد. سرعت مؤلفه محوری باید به گونه‌ای اعمال شود، که مقدار سرعت محوری در گره‌های محاسباتی بر روی سطح سوخت جامد صفر شود. با نوشتن معادله تعادل انرژی در مرز مشترک جامد-گاز رابطه زیر حاصل خواهد شد [۲۴].

$$Q_{tot} = \rho_f \dot{r} \left[\sum_{i=1}^{N_S} Y_{i+} \Delta H_{f,i}^{\circ} \right] - \Delta H_{f,HTPB}^{\circ} + \rho_f \dot{r} \sum_{i=1}^{N_S} Y_{i+} \left[\int_{T_{ref}}^{T_S} C_{p,i} dT \right] \quad (45)$$

جمله اول سمت راست رابطه بالا، بیانگر گرمای تجزیه یا میزان گرمای مورد نیاز برای تبدیل فاز جامد به فاز گازی محصولات گرماکافت است. جمله دوم نیز بیانگر آنتالپی محسوس محصولات گازی است. در معادله انرژی دو کمیت دمای سطح T_S و نرخ پسروری \dot{r} مجهول هستند. با جایگذاری رابطه (۴۳) در معادله (۴۵) معادله ضمنی زیر بر حسب دمای سطح به دست می‌آید.

$$Q_{tot} = \rho_f A \exp\left(-\frac{E_a}{R_u T_S}\right) \times \left\{ \left[\sum_{i=1}^{N_S} Y_{i+} \Delta H_{f,i}^{\circ} \right] - \Delta H_{f,HTPB}^{\circ} + \sum_{i=1}^{N_S} Y_{i+} \left[\int_{T_{ref}}^{T_S} C_{p,i} dT \right] \right\} \quad (46)$$

برای حل عددی این معادله غیرخطی می‌توان از روش نیوتن بهره گرفت.

هندسه و شرایط مرزی

به منظور سنجش کد محاسباتی توسعه داده شده، یک موتور هیبریدی تخت برای مقایسه و صحت‌آزمایی نتایج، بررسی می‌شود. موتور مذکور، توسط چیاورینی و همکارانش در دانشگاه ایالتی پنسیلوانیا ساخته شد و در شرایط کارکردی مختلفی آزمایش شد [۲۵]. در این پژوهش آزمون شماره ۸ این تحقیق تجربی مورد مطالعه عددی قرار گرفته است. طول سوخت HTPB، ۵۸۴ میلی‌متر و فشار محفظه در حدود ۳۰ بار است. طول این موتور ۸۶۰ میلی‌متر و فاصله بین دو صفحه سوخت ۲۰ میلی‌متر است. در انتهای محفظه از یک نازل همگرا-واگرا استفاده شده است. در حین انجام این پژوهش بنا به تجربه معلوم شد در صورتی که از شروع لبه حمله شرط متناظر با سوخت جامد اعمال شود، حل مسئله در ورودی با مشکل روبه‌رو خواهد شد. این امر به این دلیل است که در تعیین مقدار اولین گره محاسباتی در لبه حمله از دو سلول مجازی که توسط دو شرط مرزی متفاوت محاسبه می‌شوند، استفاده می‌شود. لذا این گره یک نقطه منفرد به حساب می‌آید. برای رفع این مشکل، به کمک تجربه، مشخص شد که بایستی در ابتدای لبه حمله از طول اضافی با شرط دیواره بی‌دررو (Adiabatic) استفاده کرد تا مشخصه‌های جریان اکساینده به حد کافی توسعه یابند. بعد از این طول اضافی مطلوب می‌توان شرط متناظر با سوخت جامد را بر روی دیواره اعمال کرد. در این پژوهش در ورودی موتور مذکور، ۱۰ سانتی‌متر طول اضافی در نظر گرفته شده است. همان‌طور که در شکل (۱) پیداست این طول از منفی ۱۰ سانتی‌متر تا صفر امتداد پیدا کرده و نقطه صفر شروع مرز متناظر با سوخت جامد است که تا نقطه ۵۸/۴ سانتی‌متر ادامه می‌یابد. از این نقطه تا نقطه ۷۲ سانتی‌متر نیز دیواره عایق در نظر گرفته شده است. و نکاتسواران در پژوهش خود، برای هندسه کامل موتور از یک شبکه محاسباتی 61×151 بهره برده است. در این

پژوهش به دلیل اعمال طول اضافی در جهت طولی و همچنین حل نصف هندسه محاسباتی به دلیل تقارن موجود در شکل، از یک شبکه 201×31 استفاده شده است. برای به دست آوردن دقت بیشتر در حل، شبکه در نزدیکی مرز متراکم شده است. نحوه اعمال شرط مرزی در دیواره پایین به صورت زیر است.

$$0 < x < 0.585 \quad (m)$$

سطح جامد همراه با گرماکافت

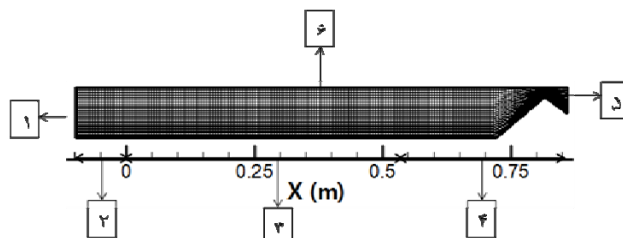
$$x \leq 0, x \geq 0.585 \quad (m)$$

دیواره عایق همراه با شرط عدم لغزش

برای دیواره بالایی هندسه نصف شده، شرط تقارن اعمال شده است. در ورودی نیز از شرط ورودی زیر صوت که مستلزم تعیین دما و فشار سکون است، استفاده شده است. دمای سکون اکسیژن ورودی برابر 300 کلوین است. شرط خروجی به گونه‌ای اعمال شده که با محاسبه عدد ماخ موضعی در هر سلول واقع در این مقطع، شرط خروجی زیر صوت یا مافوق صوت به طور خودکار ارضا شود.

در یک موتور واقعی رسیدن به شرایط کارکرد اسمی یک فرایند گذرا است. بنابراین، مدلسازی دقیق یک موتور نیازمند یک حل عددی متغیر با زمان است. اما این موضوع از لحاظ زمانی و حجم محاسبات به شدت هزینه‌بر است. از سوی دیگر در هنگام اجرای کد محاسباتی، در صورتی که فشار 30 بار به یکباره در ورودی اعمال شود، دیگراکسیژن کافی از ورودی به پایین دست جریان نرسیده و در نهایت شعله خاموش می‌شود. این نکته به وضوح در طی انجام این پژوهش دیده شده است. برای از بین بردن این مشکل، ابتدا مسئله برای فشار ورودی 2 بار حل شده و پس از رسیدن به شرایط پایا عبارت‌های مولد به گونه‌ای اضافه شدند که از رشد سریع و غیرفیزیکی آن‌ها جلوگیری شود. بعد از این که شرایط دمایی و غلظت‌ها به حالت نسبتاً پایا رسیدند، افزایش تدریجی فشار تا رسیدن به فشار کاری موتور ادامه یافت.

در شکل (۱) هندسه محاسباتی نشان داده شده است. همچنین در جدول (۴) شرایط مرزی مربوط به شکل (۱) ارائه شده است. لازم به ذکر است که، سایر کمیت‌ها را می‌توان با استفاده از روابط ترمودینامیکی به دست آورد.



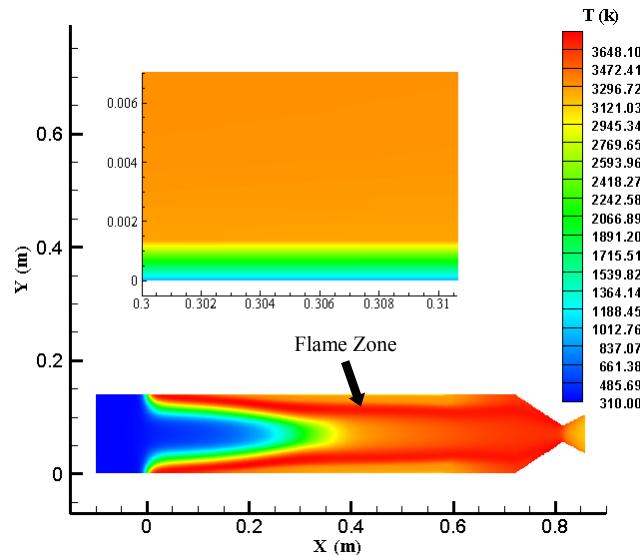
شکل ۱- هندسه محاسباتی موتور مورد نظر

جدول ۴- شرایط اعمال شده در مرزها

دیواره‌ها	شرط مرزی	کمیت تعیین شده	کمیت برون‌یابی شده
۱	ورودی مادون صوت	$T_0 = 300K$ $P_0 = 2 \rightarrow 30 \text{ bar}$	u, v
۶	شرط تقارن	$\frac{\partial u}{\partial n} = \frac{\partial v}{\partial n} = \frac{\partial T}{\partial n} = 0$ (n راستای عمود بر مرز است)	-
۲ و ۴	دیواره بی‌دررو با شرط عدم لغزش	$u=v=\frac{\partial T}{\partial n}=0$	-
۵	شرط خروجی	$If (M < 1) \rightarrow P = 1.01 \text{ bar}$	u, v, T
		$If (M > 1)$	u, v, T, P
۳	سطح جامد همراه با گرماکافت	$Eq.(46) \rightarrow T_s$ $Eq.(43,44) \rightarrow v$ $u = 0$	P

نتایج

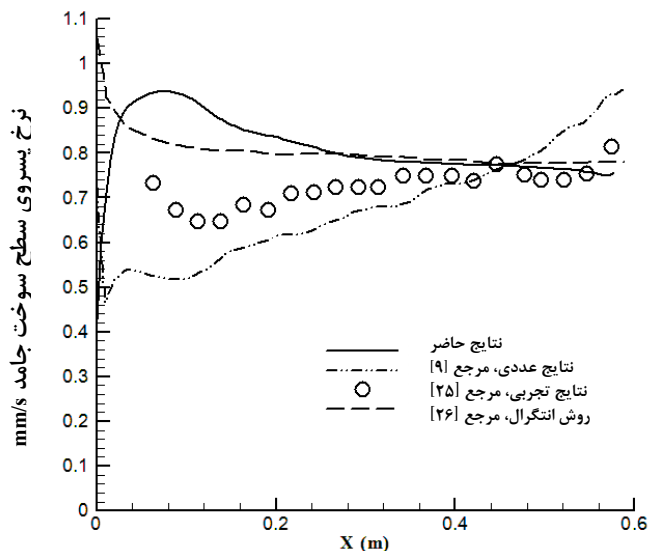
شکل (۲) توزیع دما در هندسه حل را نشان می‌دهد. مقدار بیشینه دما در ناحیه حل حدود ۳۶۵۰ کلوین است. این مقدار در قسمت همگرای نازل اتفاق می‌افتد. قابل ذکر است که در مقیاس عرضی ۷ برابر بزرگنمایی شده است. دما در ابتدای هسته جریان محترق حدود ۵۰۰ کلوین و در ناحیه شعله بیشینه آن به حدود ۳۵۰۰ کلوین می‌رسد. این مقادیر کاملاً با نتایج محاسبه شده توسط ونکاتسواران و مرکل [۹] مطابقت دارد.



شکل ۲- توزیع دما (بر حسب کلوین) در موتور مورد نظر

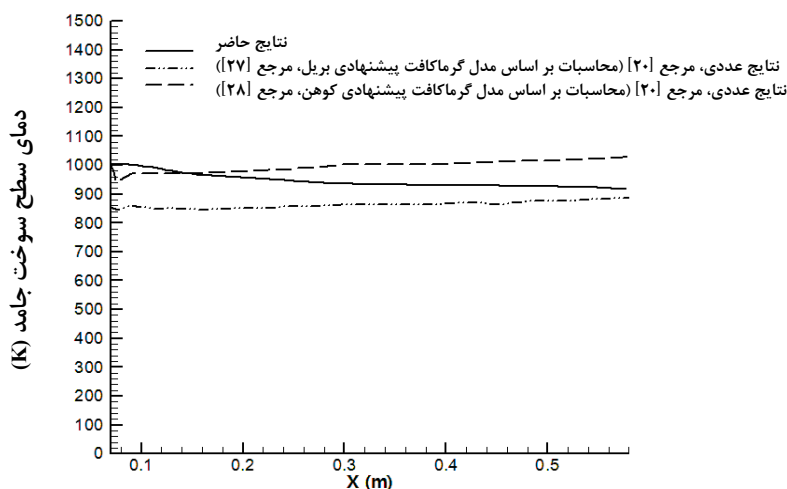
یکی از مهم‌ترین مشخصه‌ها در تعیین عملکرد یک موتور هیبریدی، متغیر نرخ پسروی است. تغییرات نرخ پسروی محاسبه شده در طول این موتور در شکل (۳) نشان داده شده است (خط توپر). به منظور اعتبارسنجی بهتر برای تغییرات طولی نرخ پسروی، نتیجه حاصله با نتایج سه روش دیگر در شکل (۳) مقایسه شده است. منحنی خط‌چین بیانگر نتایج حاصل از روشی موسوم به روش انتگرال است که در مرجع [۲۶] گزارش شده است. این روش یک تحلیل است که بر پایه نظریه لایه مرزی محترق بنا شده است. منحنی دایره‌های توخالی ناپیوسته، مربوط به نتایج حاصل از آزمایش‌های تجربی این موتور است که توسط چیاورینی و همکارانش در مرجع [۲۵] گزارش شده است. منحنی خط-نقطه نیز نتایج حاصل از پژوهش عددی ونکاتسواران و مرکل است که در مرجع [۹] ارائه شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود نتایج سه پژوهش عددی از نزدیکی خوبی در مقایسه با کار تجربی برخوردار است. این نتایج در یک‌سوم ابتدایی طول سوخت رفتارهای متفاوتی از خود نشان می‌دهند. منحنی مربوط به پژوهش حاضر و روش انتگرال در این ناحیه مقادیری بیشتر از نتایج تجربی و منحنی مربوط به پژوهش ونکاتسواران مقادیری کمتر را پیش‌بینی می‌کنند. نتایج این پژوهش نشان می‌دهد که نرخ پسروی در ابتدا با رسیدن به یک نقطه بیشینه در $x=0.7\text{cm}$ روندی افزایشی دارد و مقدار آن در این نقطه به 0.94mm/s می‌رسد. اما پس از این نقطه، شیب منحنی با پیمودن روندی کاهش‌ی به حالتی مجانب‌گونه در انتهای طول سوخت می‌گراید. دلیل پیدایش نقطه بیشینه این است که در ابتدای ناحیه برقراری شعله بر روی سوخت جامد ضخامت لایه مرزی باریک‌تر است و همان‌طور که در شکل (۲) دیده می‌شود، شعله در این ناحیه تقریباً به سطح سوخت چسبیده است، لذا نرخ انتقال گرمای هدایتی به سطح سوخت جامد در این ناحیه افزایش یافته و در نتیجه دمای سطح و به تبع آن نرخ پسروی در این نقطه بالا می‌رود. با افزایش ضخامت لایه مرزی در جهت طولی، ناحیه شعله نیز از سطح سوخت فاصله گرفته و به سمت هسته جریان متمایل می‌شود، لذا نرخ انتقال گرمای هدایتی به سطح کاهش یافته و در پی آن نرخ پسروی نیز روندی نزولی پیدا می‌کند. از نقطه بیشینه تا انتهای طول سوخت رفتار منحنی مربوط به پژوهش حاضر با منحنی حاصل از روش انتگرال همخوانی بسیار خوبی را

نشان می‌دهد. علاوه بر این دیده می‌شود که مقادیر نتایج حاصله در دوسوم انتهایی طول با نتایج تجربی و روش تحلیلی انتگرال بسیار نزدیک است. در حالی که نتایج پژوهش و نکاتسواران بیانگر روندی صعودی در یک‌سوم انتهایی طول سوخت است و همان‌طور که مشاهده می‌شود، مقادیر پیش‌بینی شده در این ناحیه از مقادیر تجربی بیشتر است.



شکل ۳- مقایسه تغییرات نرخ پسروری در طول سوخت جامد با سایر نتایج

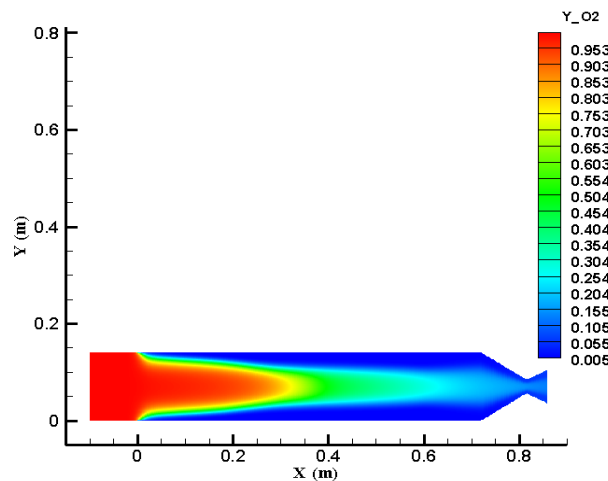
در شکل (۴) منحنی تغییرات دمای سطح سوخت جامد در طول گرین نشان داده شده است (خط توپر). همان‌طور که انتظار می‌رود تغییرات این متغیر بر اساس معادله شبه آرنیوس (۴۳)، متناظر با تغییرات نرخ پسروری در شکل (۳) است. برای تغییرات دمای سطح سوخت جامد در موتور مورد نظر هیچ‌گونه نتایج عددی و تجربی گزارش نشده است. به منظور مقایسه کیفی منحنی از نتایج عددی مرکل و ونکاتسواران استفاده شده است. آن‌ها در مرجع [۲۰] نتایج مربوط به دمای سطح سوخت جامد را که از شبیه‌سازی عددی موتور متناظر با آزمون شماره ۱۱ چیاورینی [۲۵] به دست آمده، ارائه کرده‌اند. قابل ذکر است که سوخت به کار گرفته شده در این آزمون حاوی HTPB و ۲۵ درصد کربن سیاه است. همچنین فشار بیشینه محفظه به ۴۹ بار می‌رسد. مرکل برای محاسبه دمای سطح از هر دو مدل گرماکافت پیشنهاد شده توسط بریل [۲۷] و کوهن [۲۸] استفاده کرد. در شکل (۴) منحنی مربوط به مدل کوهن با خط چین و منحنی مربوط به مدل بریل با خط- نقطه، نمایش داده شده‌اند.



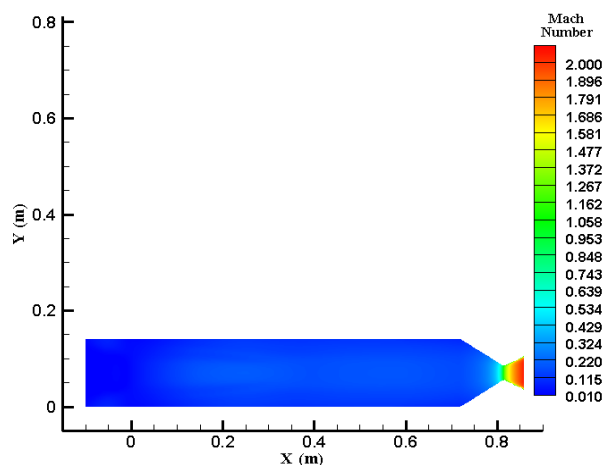
شکل ۴- تغییرات دمای سطح سوخت جامد در طول گرین

همان‌طور که دیده می‌شود، روند منحنی دمای سطح سوخت در پژوهش حاضر با منحنی‌های مربوط به پژوهش ونکاتسواران همانند نتایج ارائه شده برای نرخ پسروری اندکی متفاوت است، اما به لحاظ کمی دارای مقادیر نزدیکی هستند. هر چند به دلیل تفاوت در نوع سوخت و فشار کاری بین موتورهای مربوط به آزمون ۸ و ۱۱ نمی‌توان مقایسه دقیق انجام داد، ولی می‌توان مطمئن شد که مقادیر و روند نتایج به دست آمده منطقی است. از سوی دیگر، مرکل و ونکاتسواران به دلیل دسترسی به نتایج تجربی توانستند اثر تشعشع را با استفاده از یک رابطه تجربی در حل عددی لحاظ کنند. البته آن‌ها این رابطه را در پژوهش خود ارائه نکرده‌اند. افزایش پیچیدگی‌های حل در صورت اعمال جمله‌های تشعشعی در معادلات حاکم بر این مسئله احتراقی و همچنین عدم دسترسی به رابطه تجربی مربوط به نرخ انتقال گرمای تشعشعی، سبب شد تا در این پژوهش از اثرات پدیده تشعشع صرف‌نظر شود. خطای ناشی از در نظر نگرفتن اثر انتقال گرمای تشعشعی در فشارهای کاری بسیار بالا (بیش از ۵۰ بار) حداکثر ۱۰ درصد است [۲۰].

در شکل (۵) توزیع کسر جرمی اکسیژن نمایش داده شده است. مشاهده می‌شود که، کسر جرمی اکسیژن در هسته جریان بیشترین مقدار خود را دارد که با پیشروی در طول موتور به دلیل مصرف در ناحیه شعله از مقدار آن کاسته می‌شود. در شکل (۶) توزیع عدد ماخ نمایش داده شده است. رفتار این کانتر کاملاً منطقی و منطبق بر اصول دینامیک گاز است. همان‌طور که مشاهده می‌شود، توزیع عدد ماخ در قسمت محفظه به صورت یکنواخت است. در قسمت نازل همگرا- واگرا نیز افزایش تدریجی عدد ماخ را مشاهده می‌کنیم که با روابط گاز دینامیکی حاکم بر نازل همگرا- واگرای بدون شوک همخوانی دارد.



شکل ۵- توزیع کسر جرمی اکسیژن در موتور مورد نظر



شکل ۶- توزیع عدد ماخ در موتور مورد نظر

جمع‌بندی

در این پژوهش جریان درون یک موتور هیبریدی واقعی، با به کارگیری یک روند از دسته روش‌های پیشرفته کاهش تغییرات کلی مطالعه شد. نرخ پسروی محاسبه شده در مقایسه با نتایج تجربی، عددی و تحلیلی تطابق و سازگاری خوبی را نشان می‌دهد. نحوه توزیع و مقادیر دمای محاسباتی در ناحیه شعله و هسته جریان با نتایج حاصل از پژوهش و نکاتسواران کاملاً همخوانی دارد. مقایسه بین نتایج مربوط به توزیع دمای سطح سوخت با نتایج ارائه شده توسط و نکاتسواران حاکی از نزدیکی رفتار این منحنی‌ها به لحاظ کیفی و کمی است.

مراجع

1. Sutton, G. P., *Rocket Propulsion Elements*, 7th edition, John Wiley & Sons Inc., New York, 2001.
2. Marxman, G., and Gilbert, M., "Turbulent Boundary Layer Combustion in the Hybrid Rocket," *Proceedings of the 9th International Symposium on Combustion*, pp. 371-383, Academic Press, New York, NY, USA, 1963.
3. Estey, P., Altman, D. and McFarlane, J., "An Evaluation of Scaling Effects for Hybrid Rocket Motors," in *AIAA/SAE/ASME 27th Joint Propulsion Conference*, Sacramento, June, 1991.
4. Smoot, L. D., and Price, F. C., "Regression Rate of Nonmetalized Hybrid Fuel Systems," *AIAA Journal*, 3, pp. 1408-1413, 1965.
5. Muzzy, R. J., "Applied Hybrid Combustion Theory," in *Proceedings of the 8th AIAA/SAE Joint Propulsion Specialist Conference*, Paper No. 72 1143, New Orleans, La, USA, November-December, 1972.
6. Chiaverini, M. J., Kuo, K. K., Peretz, A., and Harting, G. C., "Regression Rate and Heat Transfer Correlations for HTPB/GOX Combustion in a Hybrid Rocket Motor," *AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit*, 34th, Cleveland, OH, July, 1998.
7. Cheng, G. C., Farmer, R. C., Jones, H. S., and McFarlane, J. S., "Numerical Simulation of the Internal Ballistics of a Hybrid Rocket Motor," in *32nd Aerospace Sciences Meeting & Exhibit*, Reno, 1994.
8. Liang, P. Y., Ungewitter, R. J., and Claflin, S. E., "CFD Analysis of the 24-Inch JIRAD Hybrid Rocket Motor," in *31st AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit*, San Diego, 1995.
9. Venkateswaran, S., and Merkle, C. L., "Size Scale-up in Hybrid Rocket Motors," *AIAA Paper 96-0647*, 1996.
10. Serin, N., and Gogus, Y. A., "Navier-Stokes Investigation on Reacting Flow Field of HTPB/O₂ Hybrid Motor and Regression Rate Evaluation," in *39th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit*, Huntsville, Alabama, July, 2003.
11. Lung Lin, J., "Two-Phase Flow Effect on Hybrid Rocket Combustion," *Acta Astronautica*, 65, Issues 7-8, Pages 1042-1057, October-November 2009.
12. Shuen, J. S. and Yoon, S., "Numerical Study of Chemically Reacting Flows Using an LU Scheme," *AIAA Paper No. 88-0436*, January, 1988.
13. Reid, R. C., Prausnitz, J. M., and Sherwood, T. K., *Properties of Gases and Liquids*, 3rd edition, McGraw-Hill, 1977.
14. Van Leer, B., Liou, M. S., and Shuen, J. S., "Splitting of Inviscid Fluxes for Real Gases," *Journal of Computational Physics*, 87, pp. 1-24, 1990.
15. Van Leer, B., "Towards the Ultimate Conservative Difference Scheme, V. A Second-Order Sequel to Godunov's Method," *Journal of Computational Physics*, 135, pp. 229-248, 1997.
16. Yu, S. T., Tsai, Y. L., and Shuen, J. S., "Three-Dimensional Calculation of Supersonic Reacting Flows Using an LU Scheme," in *27th Aerospace Sciences Meeting*, Reno, Nevada, 1989.
17. Steger, J. L. and Warming, R. F., "Flux Vector Splitting of the Inviscid Gas Dynamic Equations with Application to Finite Difference Methods," *J. Comp. Phys.*, 40, pp. 263-293, 1981.
18. Chiaverini, M. J., Harting, G. C., Lu, Y. C., Kuo, K. K., and Peretz, A., "Pyrolysis Behavior of Hybrid-Rocket Solid Fuels Under Rapid Heating Conditions," *Journal of Propulsion and Power*, 15, pp. 888-895, November-December, 1999.
19. Baldwin, B. and Lomax, H., "Thin Layer Approximation and Algebraic Model for Separated Turbulent Flows," *AIAA Paper 78-257*, January, 1978.
20. Merkle, C. L. and Venkateswaran, S., "Fundamental Phenomena on Fuel Decomposition and Boundary Layer Combustion Processes with Applications to Hybrid Rocket Motors, Part II," 106 Research Building East, Pennsylvania, Final Report 16801, 1996.
21. Babushok, V. I., and Dakdancha, A. N., "Global Kinetic Parameters for High-Temperature Gas-Phase Reactions," *Translated from Fizika Goreniya i Vzryva*, 29, pp. 48-80, July-August, 1993.
22. Tsai, Y. L., and Hsieh, K. C., "Comparative Study of Computational Efficiency of Two LU Schemes for Non-Equilibrium Reacting Flows," in *28th Aerospace Sciences Meeting*, Nevada, January, 1990.
23. Westbrook, C. K., and Dryer, F. L., "Simplified Reaction Mechanisms for the Oxidation of Hydrocarbon Fuels in Flames," *Combustion Science and Technology*, 27, pp. 31-43, 1981.
24. Chiaverini, M. J., Kuo, K. K., Peretz A., and Harting G. C., "Regression-Rate and Heat-Transfer Correlations for Hybrid Rocket Combustion," *Journal of Propulsion and Power*, 17, pp. 99-110, January-February, 2001.

25. Kuo, K. K. et al., "Fundamental Phenomena on Fuel Decomposition and Boundary Layer Combustion Processes with Applications to Hybrid Rocket Motors, Part I," 106 Research Building East, University Park, Pennsylvania, Final Report 16801, 1996.
26. Chiaverini, M. J. and Kuo, K. K., Fundamentals of Hybrid Rocket Combustion and Propulsion, AIAA, 1st ed., 2007.
27. Arisawa, H. and Brill, T. B., "Flash Pyrolysis of Hydroxyl-Terminated Polybutadiene (HTPB) II: Implications of the Kinetics to Combustion of Organic Polymers," Combustion and Flame, 106, pp. 144-154, 1996.
28. Cohen, N. S., Fleming, R. W., and Derr, R. L., "Role of Binders in Solid Propellant Combustion," AIAA, 12, pp. 212-218, February, 1974.

English Abstract

Numerical Modeling of HTPB/O₂ Combustion Process in a Hybrid Rocket Motor to Determine Solid Fuel Surface Regression Rate

M. Ahangar¹, R. Ebrahimi¹ and A. Ghafurian²

1- Department of Aerospace Engineering, K. N. Toosi University of Technology

2- Department of Aerospace Engineering, Sharif University of Technology

In this study, a two-dimensional, planar, numerical solution has been used to model the chemically reactive viscous flow in hybrid rocket motors for the purpose of determining the solid fuel regression rate. The solution employs an implicit finite-volume, lower-upper Steger-Warming scheme (LU-SW) based on Van Leer's flux vector splitting method together with MUSCL technique, which includes minmod flux-limiter function. In agreement with other experimental studies, C₄H₆ species is considered as the main gaseous product of HTPB pyrolysis. The rate of pyrolysis is described by means of an Arrhenius-type relationship. In the present work, the chemical reactions between Oxygen and C₄H₆ are presented through an 11-species and 20-Step chemistry model. Also, turbulence is simulated using the Baldwin-Lomax algebraic eddy viscosity model. The characteristics of reactive flow in port and nozzle such as temperature distribution, Mach number, regression rate and surface temperature are calculated. Numerical simulation of a lab scale motor firing is presented, whereby comparison with other computational and experimental data shows good agreement between the predicted and measured regression rate.

Keywords: Hybrid rocket engine, Chemical reacting flow, Solid fuel pyrolysis, Regression rate